УДК 622.232

Вариационный подход к получению дифференциальной функции распределения

Ехилевский С.Г., Малашенко В.В.
Донецкий национальный технический университет

Варіаційно, з використанням найбільш загальних умов отримані основні закони розподілу випадкових величин.

Высшая функция науки заключается не в том, чтобы рассчитать, доказать или даже предсказать что-либо. Она должна дать нечто большее – рациональную картину мира. Одних формул для этого недостаточно. Необходимо найти адекватные образы и математически строго определить соответствующие им понятия. Их взаимосвязи отражают единство окружающей действительности, как первоисточника научного творчества. Не менее важно определить место нового результата в общей системе знаний. Покажем, в частности, что в основе известных законов распределения случайной величины лежит понятие энтропии и закон ее возрастания.

Обсудим, вначале, вопрос о мере информации, извлекаемой из эксперимента с несколькими возможными исходами. В качестве таковой можно взять среднюю длину сообщения об его итогах [1]. Усреднение при этом проводится по всем возможным исходам. В частности, если таковой всего один, то и сообщать нечего, т.е. длина сообщения, а значит и количество извлекаемой информации равны нулю.

Очевидно, что длина сообщения определяется не только содержанием эксперимента, но и используемой системой записи. Например, итог можно описать словами, а можно перенумеровать возможные исходы (закодировать их) и по окончании опыта указывать лишь соответствующий номер. По техническим причинам в системах записи, обработки, хранения и передачи цифровой информации наибольшее распространение получила двоичная система исчисления. Т.е. номер (код) любого исхода представляет собой последовательность нулей и единиц. Чтобы объективно сравнивать количества информации, извлекаемые из разных экспериментов, нужно в каждом из них максимально лаконично кодировать сообщения. В частности нельзя присваивать исходам длинные номера, пока не использованы все более короткие. Кроме того, чтобы среднее число цифр в сообщении было минимальным, более вероятные исходы нужно кодировать в первую очередь (короткими номерами).

Для реализации выше изложенного, разобьем все исходы на две группы с примерно равными суммарными вероятностями (по 0,5 на группу). Одной из них поставим в соответствие 0, второй – 1. Затем каждую из них (содержащую более одного исхода) снова разобьем на две части с примерно равными суммарными вероятностями. Тогда первой подгруппе первой группы будет соответствовать код 00, а второй –01. Аналогично для первой и второй подгрупп второй группы имеем 10 и 11 соответственно. Разбиение по указанной процедуре будем продолжать до тех пор, пока в каждой из под…подгрупп не останется по одному исходу.

В опытах с большим числом возможных исходов подсчет длин сообщений весьма громоздок. Заметим, однако, что исходу с вероятностью p=0.5 соответствует сообщение из одной цифры. Исходу с p=0,25 – две цифры, с p=0,125 – три и.т.д. Т.е.

$$n = -\log_2 p, \qquad (1)$$

где n – число цифр (длина сообщения). Видно, что исход достоверного события (p=1) известен вообще без сообщения (n=0). Если p не равно целой отрицательной степени двойки, формула (1) является интерполяционной. При этом

$$\bar{n} = -\sum_i p_i n_i = -\sum_i p_i \log_2 p_i = I, \qquad (2)$$

где последнее равенство является определением количества информации, извлекаемой из опыта. Если последний еще не произведен, оно же может характеризовать степень неопределенности (энтропию) данного эксперимента, или любой величины, имеющей закон распределения вероятностей по своим возможным состояниям или значениям

$$S = -\sum_i p_i \log_2 p_i. \qquad (3)$$

При внешней одинаковости формул (2),(3), они определяют S и I в разные моменты времени (S –до, а I – после опыта). Соответственно до него I=0, а после S=0. Значит

$$\Delta S = -\Delta I, \qquad (4)$$

или получая информацию, мы уменьшаем степень неопределенности системы.

Обобщим данные определения на случай непрерывных случайных величин, характеризуемых дифференциальной функцией распределения $f(x)$. Предварительно заметим, что фигурирующие в (2),(3) логарифмы принято заменять натуральными, выбирая, таким образом, новый масштаб измерения энтропии ($\log_2 p_i = \ln p_i / \ln 2$). Подставив после этого в (3) $p_i = f(x_i)\Delta x_i$, получим

$$S = -\sum_i f(x_i)\Delta x_i \ln(f(x_i)\Delta x_i) =$$

$$= -\sum_i f(x_i)\Delta x_i \ln f(x_i) - \sum_i f(x_i)\Delta x_i \ln(\Delta x_i), \qquad (5)$$

где Δx_i и x_i - соответственно, длина и внутренняя точка i – го интервала, на которые разбит непрерывный спектр возможных значений случайной величины.

При этом i – й исход заключается в попадании случайной величины в i – й интервал.

Ничто не мешает сделать интервалы одинаковыми ($\Delta x_i = \Delta x$). Тогда, с учетом условия нормировки, вторая сумма в правой части (5) не зависит от вида функции распределения

$$\sum_i f(x_i)\Delta x_i \ln(\Delta x_i) = \ln(\Delta x)\sum_i f(x_i)\Delta x_i = \ln(\Delta x) . \quad (6)$$

Поэтому, если интересоваться изменением S при вариации $f(x)$, второе слагаемое в (5) можно опустить. В результате, после перехода к бесконечно малым интервалам Δx_i получим

$$S = -\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\ln f(x)\,dx . \quad (7)$$

Ниже функционал (7) будет использован для получения наиболее часто встречающихся распределений случайных величин.

Эргодическими называют системы, свойства которых в процессе эволюции перестают зависеть от ее начальных условий, даже если исключены сколь угодно малые внешние воздействия. Механизмы обеспечения эргодичности весьма разнообразны, однако в основе любого из них лежит множество случайных факторов, влияние каждого из которых на конечный результат эволюции чрезвычайно (исчезающе) мало.

Феномен эргодичности обеспечивает воспроизводимость опытов по установлению статистических закономерностей, т.к. позволяет ввести понятие статистического ансамбля – совокупности систем, эквивалентных между собой в том смысле, что они подчиняются одинаковым уравнениям движения. Добиться полной эквивалентности (совпадения и начальных условий тоже) практически невозможно. Но именно благодаря эргодичности этого и не нужно, т.к. законы распределения изучаемого случайного признака не зависят от начальных условий эволюции системы и потому одинаковы у всех элементов ансамбля.

Поскольку распределение случайного признака в данной системе не зависит от начальных условий ее эволюции, можно считать, что элементы ансамбля находятся друг по отношению к другу в некоторой хронологической последовательности. Это приводит к важнейшему следствию эргодичности – равенству средних по времени и средних по ансамблю. Чтобы оценить практическое значение последнего вывода, рассмотрим задачу об определении среднего положения молекулы газа в запаянной трубке длиной L, ориентированной горизонтально (вдоль оси OX).

Первый путь заключается в вычислении среднего по времени

$$x_{cp}(t) = \frac{1}{t}\int_0^t x(t)\,dt \quad (8)$$

и требует интегрирования уравнений движения для получения вида $x(t)$ - зависимости координаты рассматриваемой молекулы от времени. Даже если движение остальных молекул считать заданным, а закон их влияния на рассматриваемую – известным, это требует решения совершенно необозримого дифференциального уравнения

$$m\ddot{x}(t) = F(x(t), x_1(t), x_2(t), \ldots, x_n(t), \dot{x}(t), \dot{x}_1(t), \dot{x}_2(t), \ldots, \dot{x}_n(t)), \quad (9)$$

где n =6,02·10^23^·V/22,4– число молекул газа при нормальных условиях в трубке объемом V литров.

Второй путь (фактически он является единственно возможным и, как это не парадоксально, гораздо более корректным) неизмеримо проще, т.к. не требует определения механического состояния системы. Вместо интегрирования уравнений движения достаточно установить закон распределения молекул по координатам (что является гораздо более скромной информацией) и вычислить среднее по ансамблю

$$x_{cp}(t) = \int_0^L x\, f(x,t)\, dx\,. \quad (10)$$

Для определения плотности вероятности $f(x,t)$ выясним направление и конечный пункт эволюции, упомянутой в определении эргодичности. Заметим, что $f(x,t)$ является характеристикой отдельной молекулы, но в силу эргодичности утрачивает зависимость от начальных условий ее движения и потому относится к газу в целом (молекулы которого могут считаться элементами статистического ансамбля). В частности в интервале $(x, x + dx)$ находится $n\, f(x,t)\, dx$ молекул газа.

С каждым новым столкновением рассматриваемой молекулы мы утрачиваем информацию о возможном месте ее локализации. Следовательно (если пренебречь флуктуациями) энтропия функции распределения должна расти, приближаясь к своему асимптотическому значению, достигаемому при полном (насколько позволяют внешние условия) размешивании системы. После этого x_{cp}, а значит и $f(x,t)$ перестает зависеть от времени. Т.е. вид равновесного распределения $f(x)$ может быть установлен вариационно из условия экстремальности энтропии

$$S = -\int_0^L f(x) \ln f(x)\, dx\,. \quad (11)$$

Специфика задачи войдет через те или иные дополнительные условия. Рассмотрим наиболее общие из них.

Прежде всего, напомним о нормировке дифференциальной функции распределения

$$1 = \int_0^L f(x)\,d\,x\,. \qquad (12)$$

Умножив обе части (12) на некоторую постоянную α и прибавив результат к (11), получим

$$S + \alpha = -\int_0^L (f(x)\ln f(x) - \alpha f(x))\,d\,x\,. \qquad (13)$$

При фиксированном α экстремальность правой части (13) означает экстремальность S. Очевидно, интеграл минимален, если подынтегральная функция принимает минимально возможные значения во всех точках промежутка интегрирования. Эти точки равноправны, т.к. в (13) под знаком интеграла отсутствует явная зависимость от x. Значит, плотность вероятности представляет собой константу, значение которой определятся условием нормировки

$$f(x) = \frac{1}{L} \qquad (0 \le x \le L)\,. \qquad (14)$$

Равномерность экстремального распределения легко истолковать, т.к. полное отсутствие информации о локализации случайной величины не позволяет предпочесть какую-либо часть отрезка $[0,L]$ всем остальным. По этой причине, а также в силу закона больших чисел, газ равномерно заполняет весь предоставленный ему объем.

Иногда этому препятствуют внешние причины. В этом случае класс функций, на котором ищется экстремум (11), сужается. Рассмотрим, например, фильтрацию молекул через бесконечный слой однородного поглотителя. Очевидно, средняя глубина их проникновения

$$m = \int_0^\infty x\, f(x)\,d\,x \qquad (15)$$

должна быть конечной. Это качественно меняет ситуацию, приводя к явной зависимости от x под знаком интеграла в выражении для энтропии.

Умножим обе части (15) на новую постоянную β и прибавим полученное к (13), положив предварительно $L = \infty$

$$S + \alpha + \beta m = -\int_0^\infty (f(x)\ln f(x) - \alpha f(x) - \beta x\, f(x))\,d\,x\,. \qquad (16)$$

Используя приведенные выше рассуждения, подберем для каждого x свое значение f с целью минимизации подынтегральной функции в каждой точке промежутка интегрирования. Для этого, считая x параметром, а f - аргументом, продифференцируем подынтегральную функцию по f и запишем необходимое условие ее минимальности при данном x

$$\ln f(x)+1-\alpha-\beta x=0 \tag{17}$$

Фигурирующие в (17) константы определим с помощью (15) и условия нормировки. В результате получим искомую плотность вероятности

$$f(x)=\frac{1}{m}e^{-\frac{x}{m}}. \tag{18}$$

В математической статистике распределение (18) часто встречается и называется экспоненциальным. При соответствующих условиях оно действительно реализуется в задаче динамики сорбции.

Рассмотрим теперь вертикальный бильярд, в который сверху запускают шары. Претерпев столкновения с многочисленными препятствиями, шары, добравшись до низа, формируют колокол распределения $f(x)$. Если размеры бильярда по горизонтали (как в лево, так и вправо от места впуска шаров) достаточно велики, интегрировать в (11), (12) и (15) следует в пределах от минус до плюс бесконечности.

Конечность матожидания на полубесконечном интервале автоматически обеспечивает конечную дисперсию экстремального распределения. На бесконечном интервале этого приходится требовать отдельно, чтобы обеспечить реалистичность распределения

$$\sigma^2=\int_{-\infty}^{\infty}(x-m)^2 f(x)\,dx. \tag{19}$$

Тогда вместо (17) получим

$$\ln f(x)+1-\alpha-\beta x-\gamma(x-m)^2=0, \tag{20}$$

где γ - еще одна постоянная, которая вместе с α и β подбирается с помощью условий (19),(15) и (12) (разумеется, интегрирование в последних двух ведется по всей числовой оси). В результате для m=0 получим распределение

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}\,e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}, \tag{21}$$

известное как нормальный закон. Полученные распределения давно открыты, изучены и затабулированы, т.к. используются в самых разнообразных сферах деятельности человека. Причина такой популярности в том, что феномен эргодичности весьма распространен и возрастание энтропии – один из фундаментальных законов природы.

Численные методы позволяют непосредственно проследить, как нормальный закон при сужении горизонтальных размеров вертикального бильярда постепенно трансформируется в равномерное распределение на отрезке

$[-a,a]$ (рис.1). Характерным размером при этом является фигурирующее в (21) среднеквадратическое отклонение σ. Расчеты выполнялись по формуле

$$S(l/\sigma)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\left(e^{-\frac{l^2}{2\sigma^2}}+\sum_{i=1}^{\infty}\left(e^{-\frac{(l+2\pi ri)^2}{2\sigma^2}}+e^{-\frac{(l-2\pi ri)^2}{2\sigma^2}}\right)\right)= \qquad (22)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\left(e^{-\frac{x^2}{2}}+\sum_{i=1}^{\infty}\left(e^{-\frac{(x+2ai)^2}{2}}+e^{-\frac{(x-2ai)^2}{2}}\right)\right)=S(x),(-\pi r\le l\le\pi r).$$

Для ее получения бильярд свернули в цилиндр радиуса r. Считая поворот на 2π возвратом в исходную точку, для $l=r\varphi$, (здесь φ - полярный угол $(-\infty<\varphi<\infty)$) получим (22) по теореме сложения вероятностей. Меняя отношение $\pi r/\sigma=a$ от бесконечности до нуля, с помощью последнего равенства в (22) можно непосредственно проследить трансформацию нормального распределения в равномерное.

а)

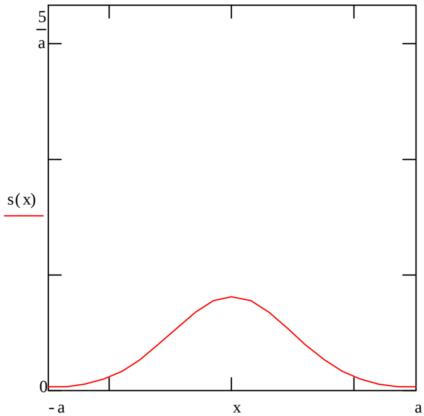
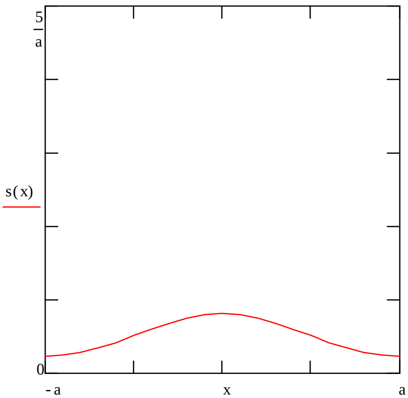
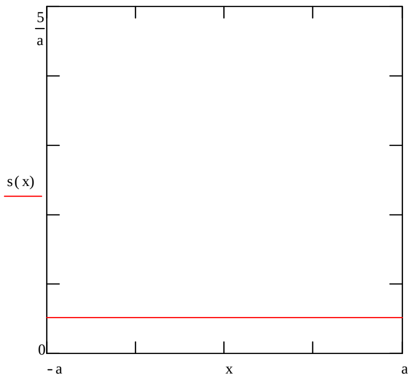


Рис.1 Эволюция нормального распределения

б



с



Литература

1. Гнеденко Б.В. Курс теории вероятностей.-М.:Наука, 1969.-400 с.